Übungszettel 11 - Propagatoren und Liouvilleraum (Abgabe: Vorlesung 16.01.2018 *oder* 17.01.2018 bis 11:15 im Fach)

Aufgabe 1 - Der Propagator (16 Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir einen Zustand $|\psi(t)\rangle$ mit $t \in \mathbb{R}$, der zu allen Zeiten die zeitabhängige Schrödingergleichung $\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$ erfüllt. Der Propagator $\hat{U}(t)$ beschreibt die Zeitentwicklung dieses Zustands vom Zeitpunkt $t = 0$, $|\psi(0)\rangle$, in den Zustand zum Zeitpunkt t, $|\psi(t)\rangle$. In Formeln ausgedrückt heißt das

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \ . \tag{1}$$

(a) Zeige explizit mit Hilfe von Gleichung (1), dass $\hat{U}(t)$ für alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$ unitär ist.
Hinweis: $|\psi(t)\rangle$ und $|\psi(0)\rangle$ müssen quantenmechanische (also normierte) Zustände repräsentieren.

(b) Zeige, dass der Operator $\hat{U}(t)$ folgende Differentialgleichung erfüllt,

$$\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{U}(t) \ . \tag{2}$$

Was muss für die Anfangsbedingung, also für $\hat{U}(t=0)$, gelten?

(c) Zeige, dass für einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator $\hat{H}(t) = \hat{H}_0$ die Differentialgleichung (2) mit der entsprechenden Anfangsbedingung durch folgenden Ansatz gelöst wird,

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \ .$$

(d) Zeige, dass für einen allgemeinen zeitunabhängigen, endlichdimensionalen Hamiltonoperator $\hat{H}_0$ folgendes gilt,

$$\hat{U}(t) = \hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{D}t}\hat{V}^\dagger \ ,$$

wobei $\hat{D}$ eine Diagonalmatrix ist, deren Einträge durch die Eigenwerte von $\hat{H}_0$ gegeben sind. Was kannst du über $\hat{V}$ aussagen?

Aufgabe 2 - Der Liouvilleraum (18 Punkte)

(a) In Aufgabe $2h$ vom achten Zettel haben wir gezeigt, dass die Menge der hermiteschen Operatoren einen Vektorraum bildet. Zeige, dass man mit dem sogenannten Hilbert-Schmidt-Skalarprodukt,

$$\left\langle \hat{A}, \hat{B} \right\rangle_{\text{HS}} = \text{Tr}\left[\hat{A}^\dagger \hat{B}\right] \ ,$$

sogar eine Hilbertraumstruktur in diesem Vektorraum erhält. $\text{Tr}[\cdot]$ bezeichnet die Spur.
Hinweis: Es genügt hier den endlichdimensionalen Fall zu betrachten. Ein Hilbertraum ist ein Vektorraum mit Skalarprodukt. Ein Skalarpodukt erfüllt die Bedingungen (i) $\left\langle \hat{A}+\hat{B}, \hat{C} \right\rangle = \left\langle \hat{A}, \hat{C} \right\rangle + \left\langle \hat{B}, \hat{C} \right\rangle$, (ii) $\left\langle \hat{A}, \lambda\hat{B} \right\rangle = \lambda\left\langle \hat{A}, \hat{B} \right\rangle \forall \lambda \in \mathbb{C}$, (iii) $\left\langle \hat{A}, \hat{B} \right\rangle = \left\langle \hat{B}, \hat{A} \right\rangle^*$, (iv) $\left\langle \hat{A}, \hat{A} \right\rangle \geq 0$, (v) $\left\langle \hat{A}, \hat{A} \right\rangle = 0 \Longleftrightarrow \hat{A} = \hat{0}$.
Bemerkung: Die Adjungation mag im Raum der hermiteschen Operatoren eigenartig erscheinen, aber man kann die Vektorraumstruktur sogar auf den Raum beliebiger linearer Operatoren erweitern und dann funktioniert das mit dem Hilbert-Schmidt-Skalarprodukt und der Erweiterung auf einen Hilbertraum immer noch!

(b) Der Raum der hermiteschen Matrizen mit dem Hilbert-Schmidt-Skalarprodukt wird Liouvilleraum genannt. Zeige, dass man für einen *reinen* Zustand $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ über den Ausdruck

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\text{pure}} = \left\langle \hat{\rho}, \hat{A}\hat{\rho} \right\rangle_{\text{HS}} \tag{3}$$

im Liouvilleraum den Erwartungswert im Hilbertraum $\left\langle \hat{A} \right\rangle_{|\psi\rangle} = \left\langle \psi | \hat{A}\psi \right\rangle$ wieder erhält.

(c) Für eine allgemeine Dichtematrix $\hat{\rho}$ ist der Erwartungswert einer Observable im Liouvilleraum durch den Ausdruck

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\hat{\rho}} = \langle A, \hat{\rho} \rangle_{\text{HS}} \ .$$

gegeben. Zeige, dass man damit für einen allgemeinen gemischten Zustand $\hat{\rho} = \sum_i c_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ in der Tat das physikalisch sinnvolle Ergebnis

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle_{\hat{\rho}} = \sum_i c_i \left\langle \hat{A} \right\rangle_{|\psi_i\rangle}$$

erhält und dass dies für einen reinen Zustand äquivalent zum Ausdruck (3) ist.

(d) Zeige, dass für einen reinen Zustand $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ die sogenannte Liouville-von-Neumann Gleichung gilt,

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)\right]_{-} ,$$

wobei $\hat{H}(t)$ der Hamiltonoperator des Systems sei und $|\psi(t)\rangle$ die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt.

Aufgabe 3 - Purity und Entropie (26 Punkte)

(a) Zeige, dass eine physikalisch normierte Dichtematrix im Sinne von $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1$ im Allgemeinen nicht normiert im Liouvilleraumsinn ist. Es gibt jedoch Dichtematrizen, die normiert in Bezug auf beide Ausdrücke sind - welche sind dies?
Hinweis: Die Norm eines Elements eines Hilbertraums ist die Wurzel des Skalarprodukts dieses Elements mit sich selbst. Der Einfachheit halber ist es sinnvoll bei der Berechnung von Spuren diagonale Dichtematrizen zu betrachten - warum ist dies keine Einschränkung der Allgemeinheit?

(b) Das Normquadrat einer Dichtematrix im Liouvilleraum, $\|\hat{\rho}\|^2$, wird auch purity ("Reinheit") genannt. Wir betrachten eine endlichdimensionale $n \times n$ Dichtematrix. Was ist der minimale und maximale Wert der purity für solch einen Zustand? Für welche Zustände werden diese Werte jeweils angenommen?
Hinweis: Es darf folgendes Lemma benutzt werde: Sei $\{c_i\}_{i=1,\ldots,n}$ eine Menge nichtnegativer reller Zahlen deren Summe eins ergibt. Die Summe der Quadrate dieser Zahlen ist minimal genau dann wenn alle c_i gleich sind und sie ist maximal genau dann wenn eines der c_i gleich eins ist und alle anderen c_i verschwinden.

(c) Man definiert die sogenannte lineare Entropie eines Zustands S_{lin} als

$$S_{\mathrm{lin}} = 1 - \|\hat{\rho}\|^2 .$$

Zeige, dass die lineare Entropie in erster Ordnung der informationstheoretischen von-Neumann Entropie $S = -\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\ln\hat{\rho}]$ entspricht.
Hinweis: Mit "erster Ordnung" ist hier gemeint, dass $\ln(\mathbb{1} + \hat{\rho}) \simeq \hat{\rho}$ bzw. $\ln(\hat{\rho}) \simeq \hat{\rho} - \mathbb{1}$.

(d) Die Entropie ist ein Maß der Unordnung eines Systems. In der Quantenstatistik beschreibt man ein quantenmechanisches System mit der Temperatur T durch ein kanonisches Ensemble, welches durch folgenden Ausdruck gegeben ist,

$$\hat{\rho} = N e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} .$$

N ist eine Normierungskonstante, sodass $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1$. Zeige mit Hilfe der linearen Entropie, dass für einen zweidimensionalen Hamiltonoperator $\hat{H}$ mit den Eigenwerten E_1 und E_2 ($E_1 < E_2$) in der Tat ein Ensemble hoher Temperatur größere Unordung besitzt als ein Ensemble niedriger Temperatur. Was geschiet in den Grenzfällen $T \to 0$ und $T \to \infty$?
Hinweis: Zeige zunächst, dass jedes zweidimensionale kanonische Ensemble in der Energieeigenbasis in der Form $\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 1-a & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}$ für einen passenden Wert von $0 \le a \le \frac{1}{2}$ geschrieben werden kann. Dann berechne die lineare Entropie für diesen Ausdruck, überlege ob diese kleiner/größer wird wenn a kleiner/größer wird und wie dies mit der Temperatur des Ensembles zusammenhängt. Für diese Aufgabe ist es nützlich folgende Relation zu zeigen: Für $0 \le a, b \le \frac{1}{2}$ gilt $a(1-a) < b(1-b)$ genau dann wenn $a < b$.

(e) Ein reiner Zustand eines Zweiqubitsystems ist allgemein über folgenden Ausdruck gegeben,

$$|\psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle .$$

Betrachte die Zustände

$$|\psi_{\mathrm{sep}}\rangle = |00\rangle , \qquad |\psi_{\mathrm{Bell}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|00\rangle + |11\rangle\right]$$

und bestimme die zugehörigen Zweiqubitdichtematrizen in der Basis $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. Bestimme außerdem die partielle Spur dieser Zustände über das zweite Qubit. Bestimme schließlich die lineare Entropie der beiden resultierenden reduzierten Zustände.
Hinweis: Durch bilden der partiellen Spur über das zweite Qubit, $\mathrm{Tr}_2[\cdot]$, erhält man die reduzierte 2×2 Dichtematrix des ersten Qubits, $\hat{\rho}_1$. Diese kann man folgendermaßen ausrechnen,

$$\hat{\rho}_1 = \mathrm{Tr}_2[\hat{\rho}] = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{\rho} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \hat{\rho} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} .$$